## ML model xTB-sTDAxTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-sTDA xTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-ML-20k xTB-ML-300k $\mathsf{S}_1$ Class $1 T_1$ Class $1 S_1$ Class $1 S_1$ Class 2 $S_1$ Class 2 $S_1$ $\mathsf{T}_1$ Class $1 T_1$ Class 2 $T_1$ Class 2 T<sub>1</sub> MOPSSAM (143) 0.26 0.17 0.16 0.11 0.11 0.59 0.17 0.13 0.10 0.08 MOPSSAM (1k) 0.20 0.17 0.16 0.15 0.39 0.19 0.15 0.12 0.14 0.14 set INDT (10k) 0.35 0.20 0.28 0.13 0.38 0.13 0.43 0.40 0.15 0.60

MAE (eV)

0.19

1.15

0.22

1.03

0.29

0.99

0.26

1.06

0.29 0.32 Verde (1.5k) 0.41 0.30 0.26 0.48 PCQC AL (200k) 0.56 1.22 0.42 0.28 0.33 0.20 0.08 1.22